

Tutorial Article

Pemanfaatan Paket Perangkat Lunak R factoextra dan FactoMineR serta Aplikasi Analisis Komponen Utama dalam Autentikasi Beragam Jenis Minyak

Irnawati^{1,3}, Florentinus Dika Octa Riswanto^{2,3}, Sugeng Riyanto⁴, Sudibyo Martono⁴, Abdul Rohman^{4*}

¹ Fakultas Farmasi Universitas Halu Oleo Kendari, Sulawesi Tenggara 93232 Indonesia

² Fakultas Farmasi, Universitas Sanata Dharma, Kampus III Paingan, Maguwoharjo, Depok, Sleman, Yogyakarta 55282 Indonesia

³ Kelompok Jurnal Kimia Analisis dan Kemometrika, Program Studi Doktor Farmasi, Fakultas Farmasi, Universitas Gadjah Mada, Yogyakarta 55281, Indonesia

⁴ Departemen Kimia Farmasi, Fakultas Farmasi, Universitas Gadjah Mada, Yogyakarta 55281 Indonesia

* Corresponding author: Abdul Rohman | email: abdulrohmanugm@gmail.com

Received: 20 April 2020; Revised: 12 June 2020; Accepted: 1 July 2020; Published on line: 14 July 2020

Abstract: Several oils have been reported as nutritional source and providing potential benefits for human life. Oil adulteration becomes major issue due to economical attempt to reduce the price of high cost oils. The employment of FTIR spectroscopy combined with Principal Component Analysis (PCA) technique can be applied in oils authentication study. Two of R software packages namely factoextra and FactoMineR were exploited to perform PCA for analysis sixteen various oils from market in Yogyakarta, Indonesia. The results showed that PCA model have been successfully generated using these two statistical packages. Individual plot, variable plot, and biplot were presented to visualize the PCA model. It was also proved that extra virgin olive oil (EVOO) has similar chemical characteristics to palm oil (PO) as reported in the previous study.

Keywords: adulteration, principal component analysis, oils, R software

Abstrak: Beberapa minyak dilaporkan sebagai sumber nutrisi dan memberikan manfaat potensial bagi kehidupan manusia. Pemalsuan minyak menjadi masalah utama seiring upaya ekonomis untuk mengurangi harga minyak yang mahal. Penggunaan spektroskopi FTIR dikombinasikan dengan teknik Analisis Komponen Utama (AKU) dapat diterapkan pada penelitian autentikasi minyak. Dua paket perangkat lunak R yaitu factoextra dan FactoMineR dimanfaatkan untuk melaksanakan AKU dalam analisis enam belas jenis minyak dari pasar di Yogyakarta, Indonesia. Hasil penelitian ini menunjukkan bahwa model AKU dapat dibangun menggunakan dua paket statistik ini. *Individual plot*, *variable plot*, dan *biplot* disajikan untuk memvisualisasikan model AKU. Hasil penelitian ini juga terbukti bahwa minyak zaitun extra virgin (MZV) memiliki karakteristik kimia yang mirip dengan minyak sawit (MSW) sebagaimana dilaporkan dalam penelitian sebelumnya.

Kata kunci: analisis komponen utama, minyak, pemalsuan, perangkat lunak R

1. PENDAHULUAN

Pada dekade terakhir penelitian tentang minyak telah banyak dilakukan [1–3]. Hal ini terjadi seiring dengan tingginya minat dan pemanfaatan minyak dalam kehidupan manusia sehari-hari [4]. Beberapa jenis minyak dimanfaatkan sebagai antibakteri [5,6], anti nyamuk [7], biopestisida [8], penyembuh luka [9], dan anti kanker [10].

Seiring dengan tingginya pemanfaatan minyak dalam kehidupan sehari-hari, beberapa kasus pemalsuan ditemukan sebagai dampak tingginya harga beberapa produk minyak dan makanan [11]. Oleh karena itu diperlukan suatu proses autentikasi untuk menjamin keaslian minyak-minyak yang beredar di pasaran. Penelitian terkait autentikasi minyak telah dilakukan untuk beberapa jenis minyak meliputi minyak zaitun [12], minyak kelapa murni [13], minyak bunga matahari [14], minyak kemiri [15], serta minyak jagung [16]. Metode yang banyak dimanfaatkan dalam autentikasi minyak adalah metode spektroskopi *Fourier Transform Infrared* (FTIR) yang dikombinasikan dengan *Principal Component Analysis* (PCA) atau Analisis Komponen Utama (AKU) [17]. Sebagai salah satu teknik kemometrika, AKU dipilih dengan tujuan mengurangi dimensi data ketika terdapat korelasi pada data tersebut [18]. AKU juga bermanfaat sebagai uji statistika pendahuluan untuk pemecahan beberapa kasus kemometrika dengan pembentukan *principle component* atau komponen utama (KU) untuk tahap analisis dan/atau visualisasi lebih lanjut [19].

AKU sebagai salah satu metode kemometrika dapat dikerjakan dengan memanfaatkan beberapa perangkat lunak seperti Minitab [20], Unscrambler [21], dan XLSTAT [22]. Meskipun demikian, perangkat-perangkat lunak tersebut merupakan perangkat lunak berbayar dengan lisensi resmi dari pengembangnya. Di sisi lain, R merupakan salah satu perangkat lunak *open source* yang menyediakan fasilitas pengolahan berbagai metode statistika dengan The GNU General Public License [23]. Meskipun R merupakan salah satu perangkat dengan fasilitas yang lengkap melalui instalasi beberapa paket statistik namun beberapa pengguna kadang mengalami kesulitan dalam mengoperasikan fungsi-fungsi statistika dengan perangkat lunak ini karena diperlukan pemahaman tentang bahasa pemrograman sehingga membutuhkan pembelajaran yang lebih intensif [24]. Sejauh ini pembahasan tentang penggunaan perangkat lunak R paket *factoextra* [25] dan *FactoMineR* [26] khususnya pemanfaatannya dalam analisis minyak masih terbatas.

Pada penelitian sebelumnya [27] telah dilakukan analisis minyak secara kemometrika berbantuan perangkat lunak TQ analyst dan Minitab. Adapun minyak yang diteliti meliputi minyak canola (MCA), minyak kelapa murni (MKM), minyak jagung (MJG), minyak zaitun ekstra virgin (MZV), minyak bawang putih (MBP), minyak jahe (MJA), minyak biji anggur (MBA), minyak jintan hitam (MJH), minyak kemiri (MKE), minyak sawit (MSW), minyak bekatul (MBK), minyak kedelai (MKD), minyak wijen (MWJ), minyak bunga matahari (MBM), dan minyak biji labu (MBL). Pada penelitian ini jenis minyak yang dianalisis merupakan jenis minyak yang serupa namun dibuat variasi pada minyak biji labu yang diekstraksi dengan dua metode berbeda yaitu soxhletasi (MLS) dan ekstraksi berbantuan ultrasound (MLU). Selain itu, pada penelitian ini metode kemometrika AKU akan dilaksanakan dengan perangkat lunak R menggunakan paket statistika *factoextra* dan *FactoMineR*. Paket *FactoMineR* berperan dalam komputasi AKU sedangkan paket *factoextra* berperan dalam ekstraksi dan visualisasi data kemometrika [25]. Tujuan dari penelitian ini adalah dapat dikembangkannya metode analisis kemometrika alternatif dengan perangkat lunak R yang dapat digunakan secara luas dan terbuka serta memberikan kontribusi dalam penelitian-penelitian lebih lanjut terkait analisis minyak yang beredar di pasaran.

2. BAHAN DAN METODE

2.1. Bahan

Minyak canola, minyak kelapa murni, minyak jagung, minyak zaitun ekstra virgin, minyak bawang putih, minyak jahe, minyak biji anggur, minyak jintan hitam, minyak kemiri, minyak sawit, minyak bekatul, minyak kedelai, minyak wijen, minyak bunga matahari, dan minyak biji labu diperoleh dari beberapa pasar di Yogyakarta, Indonesia. Proses ekstraksi minyak biji labu baik dengan soxhletasi maupun ekstraksi berbantuan ultrasound dilakukan pada Fakultas Teknologi Pertanian Universitas Gadjah Mada.

2.2. Instrumentasi dan Perangkat Lunak

Instrumen yang digunakan adalah spektrometer FTIR (Thermo Scientific Nicolet iS10, Madison, WI) dengan seperangkat perangkat lunak Omnic. Analisis kemometrika dilakukan dengan perangkat lunak R Studio versi 1.1.456 (*open source license*) yang diunduh dari <https://rstudio.com/products/rstudio/download/>. Paket statistika factoextra dan FactoMineR diunduh dan diinstal dengan perintah:

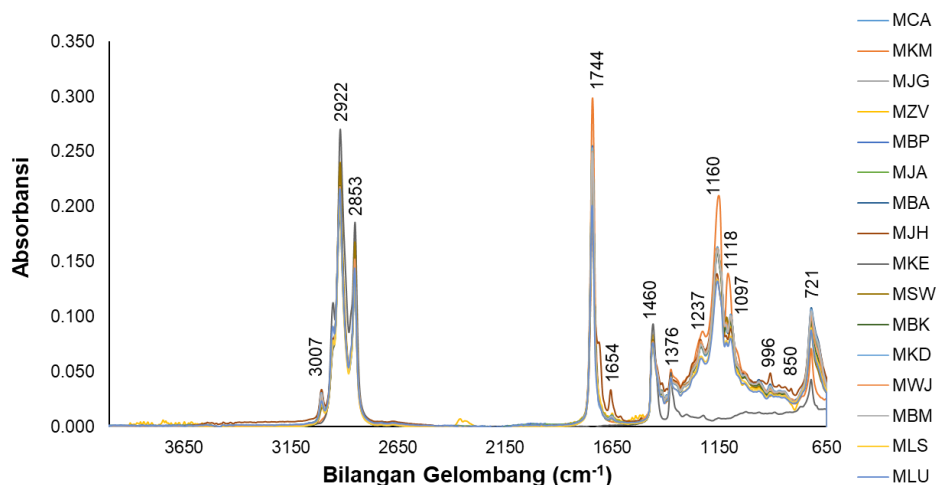
```
> install.packages("factoextra")
> install.packages("FactoMineR")
```

2.3. Metode Analisis dengan FTIR

Sejumlah 16 jenis minyak dipersiapkan dan dianalisis menggunakan FTIR pada rentang 4000-650 cm^{-1} dengan 32 pemindaian serta resolusi 8 cm^{-1} menggunakan *horizontal attenuated total reflectance* (HATR) dengan kristal ZnSe. Setiap kali pemindaian spektra FTIR dilakukan koreksi *background* terhadap udara. Luaran data berupa spektra masing-masing minyak dengan variasi absorbansi pada rentang bilangan gelombang pemindaian diolah dengan menggunakan perangkat lunak Omnic dan Microsoft Excel (Microsoft Inc., USA) kemudian disimpan dalam format .csv sehingga memungkinkan untuk dianalisis lebih lanjut menggunakan perangkat lunak R.

2.4. Analisis Komponen Utama dengan R

Spektra FTIR yang diperoleh diobservasi dan dipilih pada beberapa bilangan gelombang yang terkait dengan gugus fungsional dan bertanggung jawab terhadap serapan sebagaimana dilakukan pada penelitian sebelumnya [1]. Adapun bilangan gelombang yang dipilih meliputi 3007, 2922, 2853, 1744, 1654, 1460, 1376, 1237, 1160, 1118, 1098, 996, 850, dan 721 cm^{-1} (Gambar 1). Luaran data dalam format .csv selanjutnya diolah dengan paket factoextra dan FactoMineR. Dilakukan AKU sehingga dihasilkan KU sebagai bentuk pengurangan dimensi data. Dilakukan analisis *eigen (eigen analysis)* terhadap AKU yang telah dilaksanakan. Dilakukan juga perintah-perintah untuk menampilkan beberapa visualisasi gambar/plot yang bermanfaat dalam AKU seperti *scree plot*, *individual/score plot*, *variable/loading plot*, dan *biplot*.



Gambar 1. Spektra FTIR untuk 16 jenis minyak pada rentang 4000-650 cm^{-1} . Keterangan: minyak canola (MCA), minyak kelapa murni (MKM), minyak jagung (MJG), minyak zaitun ekstra virgin (MZV), minyak bawang putih (MBP), minyak jahe (MJA), minyak biji anggur (MBA), minyak jintan hitam (MJH), minyak kemiri (MKE), minyak sawit (MSW), minyak bekatul (MBK), minyak kedelai (MKD), minyak wijen (MWJ), minyak bunga matahari (MBM), minyak biji labu yang diekstraksi dengan soxhletasi (MLS) dan minyak biji labu yang diekstraksi dengan berbantuan ultrasound (MLU).

Tabel 1. Absorbansi pada Tiap Bilangan Gelombang Terpilih untuk Masing-Masing Sampel Minyak

| absorbansi pada tiap bilangan gelombang | | | | | | | | | | | | | | jenis |
|---|--------|--------|--------|--------|--------|--------|--------|--------|--------|---------|--------|--------|--------|-------|
| X721 | X850 | X996 | X1097 | X1118 | X1160 | X1237 | X1376 | X1460 | X1654 | X1744 | X2853 | X2922 | X3007 | |
| 0.1014 | 0.0312 | 0.0379 | 0.0962 | 0.0932 | 0.1575 | 0.0726 | 0.0433 | 0.0755 | 0.0091 | 0.2419 | 0.1446 | 0.2063 | 0.0253 | MCA |
| 0.0710 | 0.0288 | 0.0402 | 0.1203 | 0.1230 | 0.2033 | 0.0832 | 0.0522 | 0.0795 | 0.0045 | 0.2946 | 0.1614 | 0.2351 | 0.0063 | MKM |
| 0.1044 | 0.0311 | 0.0390 | 0.1011 | 0.0931 | 0.1628 | 0.0754 | 0.0458 | 0.0767 | 0.0095 | 0.2515 | 0.1465 | 0.2109 | 0.0301 | MJG |
| 0.0946 | 0.0298 | 0.0355 | 0.0909 | 0.0960 | 0.1617 | 0.0742 | 0.0466 | 0.0835 | 0.0117 | 0.2553 | 0.1680 | 0.2404 | 0.0224 | MZV |
| 0.1048 | 0.0321 | 0.0397 | 0.1009 | 0.0943 | 0.1634 | 0.0759 | 0.0460 | 0.0783 | 0.0106 | 0.2547 | 0.1504 | 0.2165 | 0.0306 | MBP |
| 0.1046 | 0.0311 | 0.0387 | 0.1004 | 0.0935 | 0.1626 | 0.0759 | 0.0460 | 0.0780 | 0.0105 | 0.2522 | 0.1484 | 0.2132 | 0.0303 | MJA |
| 0.1081 | 0.0318 | 0.0401 | 0.1022 | 0.0901 | 0.1606 | 0.0746 | 0.0448 | 0.0739 | 0.0097 | 0.2456 | 0.1344 | 0.1933 | 0.0326 | MBA |
| 0.1056 | 0.0357 | 0.0410 | 0.0890 | 0.0825 | 0.1385 | 0.0790 | 0.0481 | 0.0775 | 0.0293 | 0.1881 | 0.1393 | 0.2022 | 0.0337 | MJH |
| 0.0429 | 0.0123 | 0.0125 | 0.0078 | 0.0074 | 0.0076 | 0.0090 | 0.0487 | 0.0934 | 0.0012 | -0.0066 | 0.1846 | 0.2696 | 0.0039 | MKE |
| 0.0895 | 0.0294 | 0.0369 | 0.0955 | 0.0992 | 0.1619 | 0.0737 | 0.0454 | 0.0789 | 0.0070 | 0.2412 | 0.1676 | 0.2398 | 0.0174 | MSW |
| 0.0960 | 0.0298 | 0.0380 | 0.0954 | 0.0932 | 0.1583 | 0.0731 | 0.0453 | 0.0762 | 0.0073 | 0.2336 | 0.1522 | 0.2187 | 0.0223 | MBK |
| 0.1066 | 0.0314 | 0.0389 | 0.1018 | 0.0919 | 0.1624 | 0.0749 | 0.0449 | 0.0754 | 0.0097 | 0.2526 | 0.1411 | 0.2034 | 0.0306 | MKD |
| 0.1008 | 0.0315 | 0.0388 | 0.1001 | 0.0946 | 0.1617 | 0.0777 | 0.0452 | 0.0772 | 0.0090 | 0.2496 | 0.1523 | 0.2177 | 0.0271 | MWJ |
| 0.1050 | 0.0317 | 0.0392 | 0.1008 | 0.0918 | 0.1608 | 0.0744 | 0.0446 | 0.0746 | 0.0091 | 0.2483 | 0.1403 | 0.2022 | 0.0295 | MBM |
| 0.0898 | 0.0283 | 0.0337 | 0.0822 | 0.0784 | 0.1339 | 0.0640 | 0.0429 | 0.0726 | 0.0070 | 0.1980 | 0.1365 | 0.2012 | 0.0215 | MLS |
| 0.0878 | 0.0265 | 0.0321 | 0.0803 | 0.0765 | 0.1323 | 0.0621 | 0.0442 | 0.0760 | 0.0078 | 0.2006 | 0.1442 | 0.2155 | 0.0232 | MLU |

Keterangan: minyak canola (MCA), minyak kelapa murni (MKM), minyak jagung (MJG), minyak zaitun ekstra virgin (MZV), minyak bawang putih (MBP), minyak jahe (MJA), minyak biji anggur (MBA), minyak jintan hitam (MJH), minyak kemiri (MKE), minyak sawit (MSW), minyak bekatul (MBK), minyak kedelai (MKD), minyak wijen (MWJ), minyak bunga matahari (MBM), minyak biji labu yang diekstraksi dengan soxhletasi (MLS) dan minyak biji labu yang diekstraksi dengan berbantuan ultrasound (MLU).

3. HASIL DAN PEMBAHASAN

3.1. Preparasi Data

Pemilihan bilangan gelombang karakteristik yang bertanggung jawab terhadap serapan FTIR yang dihasilkan dilakukan terhadap data awal hasil pemindaian dari instrumen. Tabel 1 menunjukkan serapan tiap bilangan gelombang untuk masing-masing jenis minyak. Huruf "X" dituliskan pada awalan bilangan gelombang karena bilangan gelombang akan dijadikan sebagai variabel dalam AKU. Variabel ini harus dituliskan sebagai teks bukan numerik. Tabel ini selanjutnya disimpan dalam format .csv untuk proses analisis lebih lanjut. Pada perangkat lunak R studio dilakukan masukan perintah:

```
> minyak <- read.csv(file.choose())
> minyak
```

Perintah ini ditujukan untuk membuat objek/data baru dengan nama "minyak" berisi data sebagaimana Tabel 1 diikuti dengan pemanggilan objek tersebut. Keberhasilan tahap ini ditunjukkan dengan kemunculan data seperti Tabel 1 dengan dimensi 15 kolom dan 16 baris (tanpa *header*).

3.2. Pembentukan Komponen Utama

AKU dilakukan dengan pembentukan KU yang merupakan dimensi baru yang terbentuk dari data awal. Untuk menjalankan tahap ini dilakukan pemanggilan paket factoextra dan FactoMineR diikuti dengan pembentukan objek baru bernama "minyak.pca". Objek ini merupakan objek yang terbentuk sebagai hasil pengolahan AKU untuk data "minyak". Fungsi-fungsi tersebut dijalankan dengan perintah sebagai berikut:

```
> library(factoextra)
> library(FactoMineR)
> minyak.pca <- PCA(minyak[, -15], graph = FALSE)
> minyak.pca$ind$coord
```

Perintah `> minyak.pca <- PCA(minyak[, -15], graph = FALSE)` ditujukan untuk membentuk objek "minyak.pca" dari data "minyak" yang diolah secara AKU (PCA) tanpa label jenis minyak sehingga kolom ke-15 tidak digunakan untuk membentuk model AKU. Gambar data individual dan variabel tidak ditampilkan langsung sehingga perintah yang diinputkan adalah `graph = FALSE`. Perintah `> minyak.pcaindcoord` ditujukan untuk menampilkan dimensi atau KU yang terbentuk pada koordinat baru yang dihasilkan dari fungsi AKU. Berikut merupakan luaran koordinat yang diperoleh dari dimensi baru yang terbentuk:

```
> minyak.pca$ind$coord
      Dim.1      Dim.2      Dim.3      Dim.4      Dim.5
1  1.18446243 -0.73454634 -0.788593171  0.199878672 -0.39567556
2  -0.08381586  4.78336361 -0.021499914 -1.522504074  0.09156758
3  1.32651866 -0.11625266 -0.006087084  0.173574576  0.47853854
4  -0.64073447  1.51012515  0.807904228  1.360548755 -0.20933132
5  1.25487044  0.16309227  0.372584201  0.554544405  0.44184022
6  1.19866669  0.01124774  0.270009377  0.351469015  0.48794659
7  2.18502082 -1.21801669 -0.366318783 -0.447147835  0.55974413
8  1.80338392 -1.37540754  3.651973448 -0.688578003 -0.49186752
9 -11.55846298 -0.80489350  0.386551068 -0.108611654  0.29796365
10 -0.58295819  1.56103873 -0.479542530  0.941630145 -0.74767575
11  0.37478646  0.30223170 -0.582679287  0.080477269 -0.20350926
12  1.71906433 -0.67095198 -0.282741602 -0.005214645  0.37957885
13  1.00375059  0.23290180 -0.166506673  0.516312581  0.01591377
14  1.71780925 -0.75833447 -0.484194109 -0.129588325  0.22591013
15 -0.02410240 -1.75866576 -1.471092512 -0.896651236 -0.65293255
16 -0.87825969 -1.12693206 -0.839766656 -0.380139647 -0.27801152
```

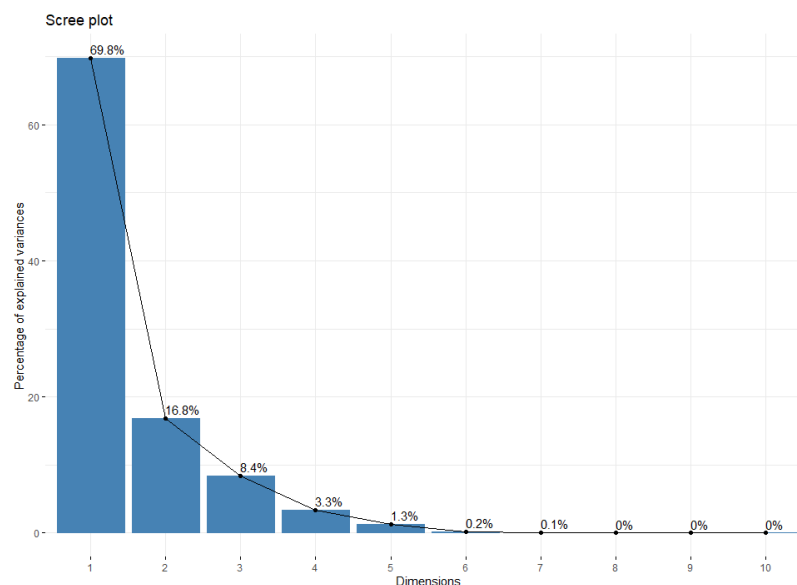
3.3. Analisis Eigen dan Variansi

Dalam istilah matematika, KU adalah vektor eigen dari matriks kovarians dan teknik untuk menghasilkan vektor eigen ini disebut analisis eigen. Dari masing-masing KU atau dimensi diperoleh

pula nilai eigen yang mengindikasikan jumlah variansi dalam kumpulan data yang terdapat pada KU tersebut [18]. Nilai eigen dan variansi dari model AKU yang terbentuk dapat ditampilkan dengan perintah `> get_eig(minyak.pca)` sehingga diperoleh luaran sebagai berikut:

```
> get_eig(minyak.pca)
      eigenvalue variance.percent cumulative.variance.percent
Dim.1  9.773877e+00    6.981341e+01    69.81341
Dim.2  2.358410e+00    1.684579e+01    86.65920
Dim.3  1.180515e+00    8.432251e+00    95.09145
Dim.4  4.675719e-01    3.339800e+00    98.43125
Dim.5  1.759076e-01    1.256483e+00    99.68773
Dim.6  2.567940e-02    1.834243e-01    99.87116
Dim.7  1.279547e-02    9.139623e-02    99.96255
Dim.8  2.341193e-03    1.672281e-02    99.97928
Dim.9  1.401521e-03    1.001087e-02    99.98929
Dim.10 8.157167e-04    5.826548e-03    99.99511
Dim.11 5.176492e-04    3.697494e-03    99.99881
Dim.12 9.124999e-05    6.517856e-04    99.99946
Dim.13 7.270818e-05    5.193442e-04    99.99998
Dim.14 2.634946e-06    1.882104e-05    100.00000
```

Pada luaran tersebut dapat diamati nilai eigen, persentase variansi, dan persentase variansi kumulatif untuk masing-masing KU atau dimensi. Jika diamati secara jumlah, Nilai eigen dapat dihitung secara total dan diperoleh nilai 14. Hasil ini sesuai dengan jumlah 14 dimensi yang terbentuk. Dapat diamati bahwa variabel dimensi ini tidak berkurang dari jumlah awal yaitu 14 bilangan gelombang. Meskipun demikian, pada dimensi kelima dinyatakan sudah memiliki persentase variansi kumulatif hingga lebih dari 99%. Hal ini menunjukkan bahwa lima KU sudah mengandung lebih dari 99% variansi dari data awal. Hal ini juga dapat diamati lebih jelas dengan menggunakan *scree plot* yang dapat ditampilkan dengan perintah sebagai berikut `> fviz_screplot(minyak.pca, addlabels = TRUE)`. Gambar 2 menunjukkan *scree plot* yang dihasilkan sebagai plot antara dimensi versus persentase variansi.



Gambar 2. *Scree plot* dari model “minyak.pca”

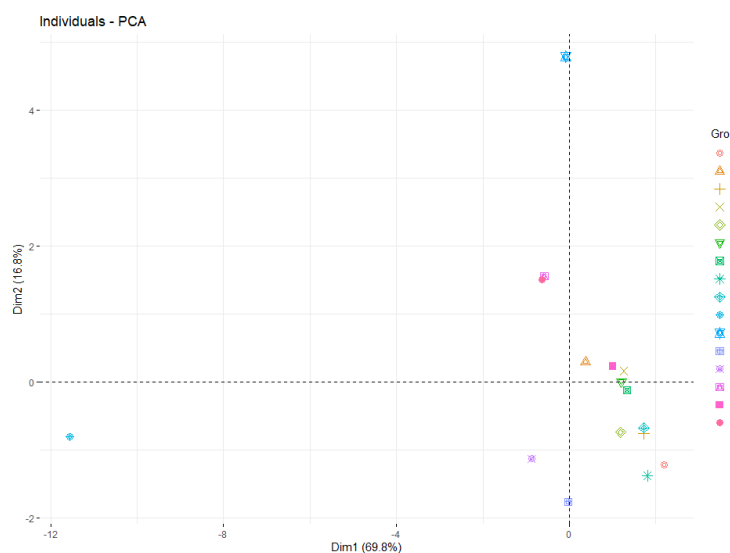
3.4. Visualisasi AKU untuk Analisis Minyak

Model AKU yang dihasilkan dapat ditampilkan secara visual dengan beberapa plot yang bermanfaat dalam interpretasi data meliputi *individual/score plot*, *variable/loading plot*, dan *biplot*.

Individual plot atau *score plot* merupakan gambaran visual dari suatu model yang terbentuk dari KU sebagai dimensi baru sehingga lebih mudah dipahami dan diinterpretasikan [28]. *Variable plot* atau *loading plot* merupakan gambaran visual yang bertujuan menampilkan kepentingan relatif dari variabel-variabel asli termasuk menunjukkan jika mungkin ada korelasi antar variabel tersebut [29]. *Biplot* merupakan gambaran *superimposition* dari *individual plot* dan *variable plot* [30]. Ketiga plot ini dapat ditampilkan dengan perintah sebagai berikut:

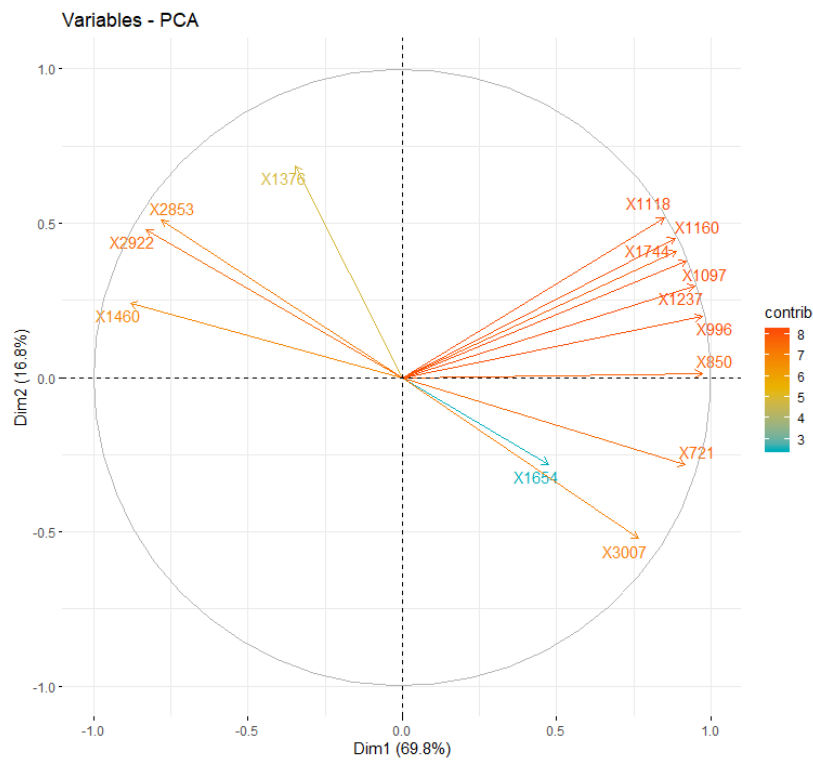
```
> fviz_pca_ind(minyak.pca, label= "all", geom = "point",
  habillage=minyak$jenis)
> fviz_pca_var(minyak.pca, col.var="contrib",
  gradient.cols = c("#00AFBB", "#E7B800", "#FC4E07"),
  repel = TRUE)
> fviz_pca_biplot(minyak.pca, label= "all", geom = "point",
  habillage=minyak$jenis)
```

Gambar 3 menampilkan *individual plot* untuk “minyak.pca”. Dapat diamati bahwa pada plot ini ditampilkan posisi/vektor tiap jenis minyak pada dua KU yaitu Dimensi 1 (dengan 69.8% variansi) dan Dimensi 2 (dengan 16.8% variansi). Posisi yang ditunjukkan untuk setiap jenis minyak sesuai dengan koordinat yang muncul sebagai luaran perintah `> minyak.pcaindcoord` yang telah dijalankan sebelumnya. Pada plot tersebut juga dapat diamati bahwa MKE dan MKM memiliki karakteristik yang relatif paling berbeda terhadap 14 jenis minyak yang lain ditinjau dari absorbansinya pada 14 bilangan gelombang terpilih. Sebaliknya, MZV dan MSW memiliki karakteristik yang relatif serupa sehingga keduanya berpotensi untuk dipalsukan akibat kemiripan ditinjau dari sisi kimiawinya [27].

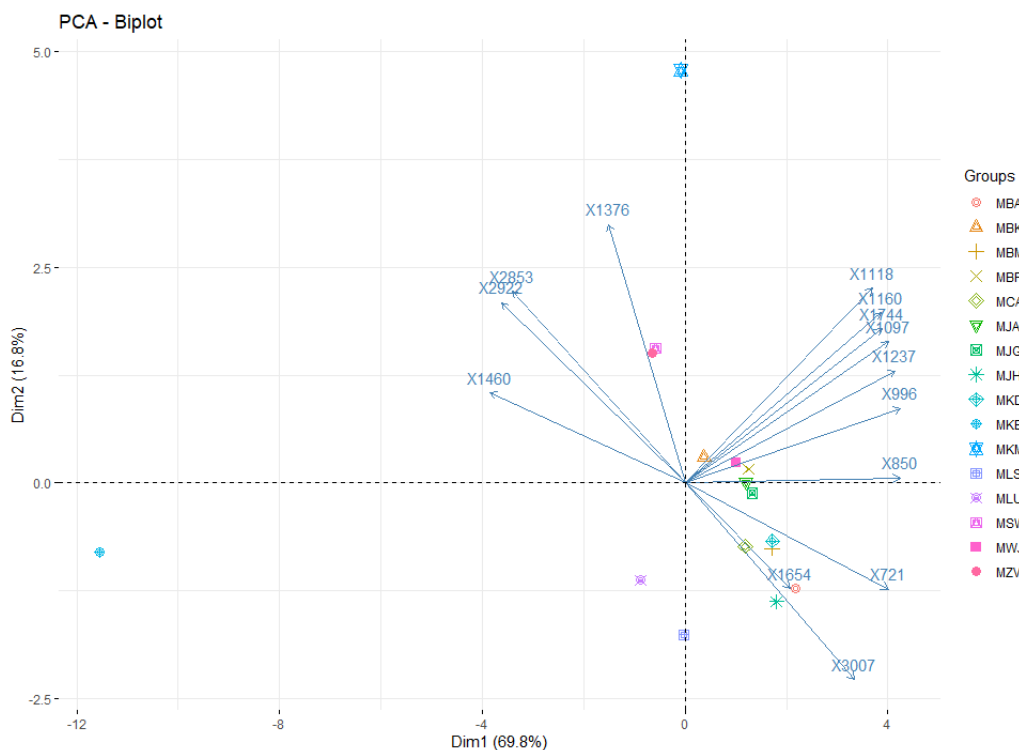


Gambar 3. *Individual plot* dari model “minyak.pca”

Gambar 4 menampilkan *variable plot* untuk “minyak.pca”. Pada plot ini ditampilkan juga kontribusi tiap variabel (*contribution*) bilangan gelombang dengan visualisasi gradasi warna. Gambar 5 menampilkan *biplot* untuk “minyak.pca”. Gambaran *superimpose* pada biplot dapat memberikan informasi hubungan antara pengaruh variabel bilangan gelombang terhadap pemisahan jenis-jenis minyak. Misalnya, bilangan gelombang 1376 cm^{-1} memberikan pengaruh terhadap vektor MKM dan MLS. Arah panah X_{1376} yang mengarah ke MKM ternyata menunjukkan nilai absorbansi MKM yang tinggi, sebaliknya MLS berada pada sisi yang berlawanan terhadap anak panah dan terbukti pada bilangan gelombang 1376 cm^{-1} nilai absorbansi MLS rendah.



Gambar 4. Variable plot dari model "minyak.pca"



Gambar 5. Biplot dari model "minyak.pca"

4. KESIMPULAN

Paket statistika factextra dan FactoMineR pada perangkat lunak R dapat dimanfaatkan pada AKU dalam autentikasi beragam jenis minyak. Sebagaimana penelitian sebelumnya, MZV dan MSW merupakan dua jenis minyak memiliki kemiripan karakteristik ditinjau dari sisi kimiawinya.

Visualisasi AKU dengan *individual plot*, *variable plot*, dan *biplot* mampu merepresentasikan AKU untuk beragam jenis minyak secara informatif.

Pemanfaatan perangkat lunak R untuk tujuan kemometrika yang lain masih dapat dikembangkan. Penggunaan paket statistika R lain seperti *mdatools*, *ChemometricsWithR*, dan *mixOmics* dapat digunakan pula sebagai alternatif paket untuk menjalankan beberapa fungsi kemometrika.

UCAPAN TERIMA KASIH

Penulis mengucapkan terima kasih yang sebesar-besarnya kepada Kemenristekdikti melalui Hibah Penelitian Dasar Unggulan Perguruan Tinggi (PDUPT) 2019 dengan nomor kontrak 2519/UN1.DITLIT/DIT-LIT/LT/2019. Penulis juga berterima kasih kepada Fakultas Farmasi, Fakultas Teknologi Pertanian, serta Laboratorium Penelitian dan Pengujian Terpadu Universitas Gadjah Mada atas fasilitas laboratorium selama pelaksanaan penelitian ini.

DAFTAR PUSTAKA

1. Irnawati; Riyanto, S.; Martono, S.; Rohman, A. Analysis of Palm Oil As Oil Adulterant in Olive and Pumpkin Seed Oils in Ternary Mixture Systems Using Ftir Spectroscopy and Chemometrics. *Int. J. Appl. Pharm.* **2019**, *11*, 210–215.
2. Mas'ud, F.; Mahendradatta, M.; Laga, A.; Zainal, Z. Optimization of mango seed kernel oil extraction using response surface methodology. *OCL* **2017**, *24*, D503.
3. Shah, M.; Garg, S.K. Application of 2 k Full Factorial Design in Optimization of Solvent-Free Microwave Extraction of Ginger Essential Oil. *J. Eng.* **2014**, *2014*, 828606.
4. Kiritsakis, A.K.; Kyritsakis, K.A.; Mavroudi, M.N. Fats and oils. In *The Mediterranean Diet: Constituents and Health Promotion*; 2001 ISBN 9781420042221.
5. Singh, R.; Shushni, M.A.M.; Belkheir, A. Antibacterial and antioxidant activities of Mentha piperita L. *Arab. J. Chem.* **2015**, *8*, 322–328.
6. Swamy, M.K.; Akhtar, M.S.; Sinniah, U.R. Antimicrobial properties of plant essential oils against human pathogens and their mode of action: An updated review. *Evidence-based Complement. Altern. Med.* **2016**, *2016*, 1–21.
7. Phasomkusolsil, S.; Soonwera, M. Comparative mosquito repellency of essential oils against Aedes aegypti (Linn.), Anopheles dirus (Peyton and Harrison) and Culex quinquefasciatus (Say). *Asian Pac. J. Trop. Biomed.* **2011**, *1*, 113–118.
8. Tripathi, A.K.; Upadhyay, S.; Bhuiyan, M.; Bhattacharya, P.R. A review on prospects of essential oils as biopesticide in insect-pest management. *J. Pharmacogn. Phyther.* **2009**, *1*, 52–63.
9. Saporito, F.; Sandri, G.; Bonferoni, M.C.; Rossi, S.; Boselli, C.; Cornaglia, A.I.; Mannucci, B.; Grisoli, P.; Vigani, B.; Ferrari, F. Essential oil-loaded lipid nanoparticles for wound healing. *Int. J. Nanomedicine* **2018**, *13*, 175–186.
10. Celia, C.; Trapasso, E.; Locatelli, M.; Navarra, M.; Ventura, C.A.; Wolfram, J.; Carafa, M.; Morittu, V.M.; Britti, D.; Di Marzio, L.; et al. Anticancer activity of liposomal bergamot essential oil (BEO) on human neuroblastoma cells. *Colloids Surfaces B Biointerfaces* **2013**, *112*, 548–553.
11. Johnson, R. Food fraud and “Economically motivated adulteration” of food and food ingredients. In *Food Fraud and Adulterated Ingredients: Background, Issues, and Federal Action*; 2014 ISBN 9781631177316.
12. Rohman, A.; Che Man, Y.B. Fourier transform infrared (FTIR) spectroscopy for analysis of extra virgin olive oil adulterated with palm oil. *Food Res. Int.* **2010**, *43*, 886–892.
13. Rohman, A.; Che Man, Y.B. Potential Use of FTIR-ATR Spectroscopic Method for Determination of Virgin Coconut Oil and Extra Virgin Olive Oil in Ternary Mixture Systems. *Food Anal. Methods* **2011**, *4*, 155–162.
14. Downey, G.; McIntyre, P.; Davies, A.N. Detecting and quantifying sunflower oil adulteration in extra virgin olive oils from the Eastern Mediterranean by visible and near-infrared spectroscopy. *J. Agric. Food Chem.* **2002**, *50*, 5520–5525.
15. Ozen, B.F.; Mauer, L.J. Detection of hazelnut oil adulteration using FT-IR spectroscopy. *J. Agric.*

- Food Chem.* **2002**, *50*, 3898–3901.
16. Özdemir, D.; Öztürk, B. Near infrared spectroscopic determination of olive oil adulteration with sunflower and corn oil. *J. Food Drug Anal.* **2007**, *15*, 40–47.
 17. Rohman, A.; Che Man, Y.B. Application of Fourier Transform Infrared Spectroscopy for Authentication of Functional Food Oils. *Appl. Spectrosc. Rev.* **2012**, *47*, 1–13.
 18. Miller, J.M.; Miller, J.C. *Statistics and Chemometrics for Analytical Chemistry*; 2010; ISBN 9780273730422.
 19. Brereton, R.G. *Applied Chemometrics for Scientists*; John Wiley & Sons, Ltd: Chichester, 2007; ISBN 0470016868.
 20. Meirawan, D.; Ana, A.; Saripudin, S. Priority of VHS Development Based in Potential Area using Principal Component Analysis. In Proceedings of the IOP Conference Series: Materials Science and Engineering; 2018; p. 012027.
 21. Neagu, C.; Barbu, V. Principal component analysis of the factors involved in the extraction of beetroot betalains. *Agroalim. Process Technol.* **2014**, *20*, 311–318.
 22. David, W.; Ramadhan, K.; Supandri, E.; Kasim, A. Research Article Principle component analysis (PCA) of selected liquid smoke by product. *J. Chem. Pharm. Res.* **2014**, *6*, 239–242.
 23. R Core Team R Development Core Team. *R A Lang. Environ. Stat. Comput.* **2015**, *55*, 275–286.
 24. Eglen, S.J. A quick guide to teaching R programming to computational biology students. *PLoS Comput. Biol.* **2009**, *5*, 8–11.
 25. Kassambara, A.; Mundt, F. Package “factoextra” for R: Extract and Visualize the Results of Multivariate Data Analyses. *R Packag. version 2017*, 1–77.
 26. Lê, S.; Josse, J.; Husson, F. FactoMineR: An R package for multivariate analysis. *J. Stat. Softw.* **2008**, *25*, 1–18.
 27. Irnawati; Riyanto, S.; Martono, Su.; Rohman, A. The employment of FTIR spectroscopy and chemometrics for authentication of essential oil of curcuma mangga from candle nut oil. *Food Res.* **2020**, *4*, 42–48.
 28. Brereton, R.G. *Chemometrics for Pattern Recognition*; John Wiley & Sons, Ltd.: West Sussex, 2009; ISBN 9780470987254.
 29. Komsta, L.; Heyden, Y. Vander; Sherma, J. *Chemometrics in Chromatography*; 2018;
 30. Brereton, R.G. *Chemometrics: Data Analysis for the Laboratory and Chemical Plant*; John Wiley & Sons Ltd: West Sussex, 2003; ISBN 9780470863244.



© 2021 by the authors. Submitted for possible open access publication under the terms and conditions of the Creative Commons Attribution (CC BY) license (<http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>).